

На правах рукописи

Попов Иван Сергеевич

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО
КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ
СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ XY-МОДЕЛИ
МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО**

01.04.02 – теоретическая физика

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Казань – 2016

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ФГБОУ ВПО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского».

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук профессор Прудников Павел Владимирович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Рыжов Валентин Николаевич, Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина доктор физико-математических наук, профессор Овчинников Александр Сергеевич, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина
Ведущая организация:	Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук (ДНЦ РАН)

Защита состоится «_____» месяца 2016 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.081.15 при ФГАОУ ВО "Казанском (Приволжском) федеральном университете" по адресу: 420008, Казань, ул. Кремлевская, 16а.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского ФГАОУ ВО "Казанском (Приволжском) федеральном университете".
Электронная версия размещена на сайте <http://www.kpfu.ru/>.

Автореферат разослан «_____» месяца 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 212.081.15
д.ф.-м.н., профессор

Еремин М.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Особенности критического поведения систем вблизи точки фазового перехода второго рода связаны с возникновением в критическом состоянии аномально больших, долгоживущих и сильно взаимодействующих флуктуаций основных термодинамических величин. Понижение размерности рассматриваемых систем приводит к усилению флуктуационных эффектов.

Особое место среди низкоразмерных систем занимают двумерные системы с непрерывной симметрией. Известно, что в данных системах дальний порядок разрушается при всех конечных температурах. Однако случай двумерной ХУ-модели характеризуется осуществлением в системе топологического фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса при температуре $T_{\text{ВКТ}}$. Фазовый переход связан с диссоциацией связанных пар вихрь-антивихрь в точке перехода. Особенностью данной системы является аномально сильная пространственная и временная корреляция состояний системы во всей низкотемпературной фазе $T < T_{\text{ВКТ}}$, характеризуемая степенным законом спада, в то время как для термодинамических фазовых переходов второго рода эффекты сильной корреляции осуществляются лишь вблизи критической точки. Это позволяет наблюдать медленную динамику двумерной ХУ-модели не только вблизи критической точки, а во всем низкотемпературном диапазоне $T \leq T_{\text{ВКТ}}$.

Двумерная ХУ-модель является одной из базовых фундаментальных моделей исследования фазовых переходов и критических явлений и применяется для описания широкого спектра реальных физических систем [1, 2], в частности ультратонких магнитных пленок, планарных магнетиков типа «легкая плоскость», сверхтекучих тонких пленок, двумерных кристаллов и двумерной турбулентности.

Хотя равновесные свойства двумерной ХУ-модели к настоящему времени достаточно подробно исследованы, неравновесная релаксация и влияние структурного беспорядка на критические свойства вызывают значительный научный интерес. Связано это с явлениями медленной релаксации из начального неравновесного состояния, в частности эффектами старения, памяти и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы, а также влиянием на них сильной вихревой неравновесности, кластеризации областей квазидальнего порядка и пиннинга вихрей на дефектах.

Цели работы

– исследование влияния структурного беспорядка на неравновесные эффекты старения и нарушение флуктуационно-диссипативной теоремы в системе.

– определение влияния неравновесной вихревой динамики и спин-волновых элементарных возбуждений на процесс медленной критической релаксации системы из начального вихревого и безвихревого неравновесного состояния.

– исследование неравновесной критической кластеризации в системе с дефектами для различных начальных неравновесных состояний, исследование взаимного влияния процесса локального упорядочения в области квазидально-го порядка и процессов неравновесной вихревой динамики.

– численное исследование поперечной жесткости структурно неупорядоченной системы в низкотемпературной фазе, определение пределов применимости спин-волнового приближения и сравнение с результатами для однородной системы.

– исследование динамических критических свойств двумерной ХУ-модели в рамках диссипативной модели критической релаксации и модели с сохраняющимся параметром порядка.

Научная новизна результатов

1. Впервые осуществлено численное моделирование неравновесной критической релаксации структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}$ в широком диапазоне спиновой концентрации p из двух различных неравновесных начальных состояний – низкотемпературного $T_0 = 0$ и высокотемпературного $T_0 \gg T_{\text{ВКТ}}$. Исследованы эффекты старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в широком диапазоне времен ожидания t_w и определены асимптотики перехода $t_w \rightarrow \infty$ на скейлинговых динамических режимах. Определены температурные зависимости асимптотического значения величины флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ : степенные для начального высокотемпературного состояния и универсальная линейная – для низкотемпературного.

2. Впервые обнаружены эффекты субстарения для релаксации однородной и структурно неупорядоченной системы из начального низкотемпературного состояния. Исследованы соответствующие скейлинги и определена температурная и концентрационная зависимости индекса субстарения $\mu(T, p)$. Показано, что $\mu(T, p) = \eta(T, p)$, где $\eta(T, p)$ – показатель аномальной размерности системы, определяющий степенной закон спада пространственной и временной корреляции состояний системы в низкотемпературной фазе.

3. Впервые показано, что спин-волновое приближение принципиально не позволяет получить правильной температурной зависимости поперечной жесткости для системы с дефектами, и для адекватного описания свойств неупорядоченной системы даже в области низких температур требуется учет взаимодействия вихревой составляющей с полем дефектов структуры.

4. Впервые осуществлено прямое численное исследование кластеризации

в однородной и структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели. Обнаружен эффект аномального замедления процесса кластерного огрубления в неупорядоченной системе.

5. Впервые разработан и реализован метод поиска и идентификации вихревых элементарных возбуждений в структурно неупорядоченной системе. Исследованы динамические зависимости процесса неравновесного пиннинга вихревых возбуждений. Показано, что динамика кластерного огрубления определяется динамикой свободных и пиннированных вихревых возбуждений, и аномальное замедление кластеризации связано с замедлением вихревой динамики вследствие пиннинга вихревых возбуждений на дефектах.

6. Впервые показано, что неравновесное критическое поведение двумерной ХУ-модели во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}$ описывается в рамках релаксационной модели А с несохраняющимся параметром порядка, а применение модели В с сохраняющимся параметром порядка возможно только в области низких температур $T \ll T_{\text{ВКТ}}$.

Научная и практическая значимость работы

Научная значимость работы обусловлена важностью выявления природы неравновесных процессов критической релаксации в структурно неупорядоченных системах и необходимостью разработки и апробации методик численного исследования неравновесных критических явлений. Особую значимость результаты работы приобретают при интерпретации результатов натурных экспериментов над системами с медленной динамикой, в частности при нарушении связи между корреляционными функциями и функциями отклика.

Практическая значимость работы обусловлена применением двумерной ХУ-модели для описания поведения и свойств широкого ряда физических систем, поэтому выявленные в диссертации особенности неравновесного поведения модели должны учитываться при их описании. В частности, поведение магнитных структур Ni/Cu(100), Co/Cu(100), Co-Ni/Cu(100) на основе ультратонких магнитных пленок Ni, Co и Co-Ni с толщинами $N < 4 - 6$ монослоев на металлической подложке из Cu(100) описывается двумерной ХУ-моделью. Поэтому в искусственных магнитных структурах, создаваемых на их основе и обладающих эффектом гигантского магнитосопротивления, необходимо при процессах включения и выключения внешнего магнитного поля учитывать эффекты неравновесности, обусловленные медленной динамикой данных систем.

Полученные в диссертации результаты вносят существенный вклад в физику фазовых переходов и области исследования критического поведения низкоразмерных систем с непрерывной симметрией, характеризующихся аномально медленной динамикой.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Методика численного исследования неравновесных критических свойств однородной и структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели при релаксации из различных начальных неравновесных состояний и методика определения температурных и концентрационных зависимостей асимптотического значения величины флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ с использованием скейлинговых зависимостей и набора времен ожидания t_w широкого диапазона.

2. Неравновесная критическая релаксация системы из низкотемпературного состояния демонстрирует эффекты субстарения с показателем $\mu(T, p) = \eta(T, p)$. Температурная зависимость асимптотического значения флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ характеризуется универсальной зависимостью от $T/T_{\text{ВКТ}}(p)$ для различных спиновых концентраций p .

3. При релаксации системы из начального высокотемпературного состояния температурная зависимость асимптотического значения флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ имеет степенной вид. Введение в систему дефектов структуры приводит к понижению критического значения флуктуационно - диссипативного отношения в $T_{\text{ВКТ}}$ за счет процесса пиннинга вихрей.

4. Полученные численно и аналитически значения поперечной жесткости в однородной и структурно неупорядоченной системах указывают на существование нелинейных ангармонических спин-волновых эффектов и вкладов от межвихревого взаимодействия в чистой системе. Спин-волновое приближение не применимо для неупорядоченной системы вследствие пиннинга вихревых возбуждений на дефектах.

5. Методика исследования неравновесного процесса кластеризации и неравновесной вихревой динамики в однородной и структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели при релаксации из высокотемпературного и низкотемпературного начального состояния. Эффект аномального замедления процесса огрубления в структурно неупорядоченной системе обусловлен «окаймляющим» действием вихревой подсистемы.

6. Релаксация двумерной ХУ-модели в низкотемпературной фазе корректно описывается динамикой Метрополиса с несохраняющимся параметром порядка, в то время как динамика Кавасаки с сохраняющимся параметром применима для описания только низкотемпературных свойств с $T \ll T_{\text{ВКТ}}$.

Апробация работы

Основные результаты научной работы докладывались и обсуждались на Всероссийском научном семинаре «Вычислительная физика: алгоритмы, методы и результаты» (Таруса, 2011), на региональных научно-практических

конференциях «Молодежь третьего тысячелетия» (Омск, 2011, 2012, 2013, 2014), на VIII Международной научно-технической конференции «Динамика систем, механизмов и машин» (Омск, 2012), на научно-практических семинарах «Вычислительная физика и суперкомпьютерные технологии» (Омск, 2012, 2013, 2014), на «XXV IUPAP Conference on Computational Physics» (Moscow, 2013), на «Moscow International Symposium on Magnetism (MISM)» (Moscow, 2014), на «Двадцать первой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых» (ВНКСФ-21, Омск, 2015), на Международной конференции «Spin physics, spin chemistry and spin technology» (St. Petersburg, 2015), на «International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond» (Moscow, 2015), на семинаре «Методы суперкомпьютерного моделирования» (Таруса, 2015), а также на научных семинарах кафедры теоретической физики ОмГУ.

Публикации

Список публикаций автора по теме диссертации включает 25 работ, опубликованных в российских и иностранных журналах, сборниках трудов и материалах конференций, из которых 8 статей в журналах из баз цитирования Scopus и Web of Science и перечня ВАК, монография и статья в сборнике, а также 4 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Объем диссертации – 162 страниц машинописного текста, в том числе 35 рисунков, 7 таблиц и список цитируемой литературы из 274 наименований.

Краткое содержание работы

Во введении обоснована актуальность выбранной темы диссертационной работы и сформулированы основные цели исследований.

В первой главе, имеющей обзорный характер, в краткой форме изложен ряд концепций и методов в области описания критического поведения. Рассматриваются особенности низкоразмерных систем с непрерывной симметрией, релаксационных процессов в системах с медленной динамикой и процессов кластеризации в «огрубляющихся» системах. Представлен обзор существующих достижений в данной области.

Двумерная XY-модель является решеточной моделью с непрерывной симметрией и гамильтонианом вида

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

где $J > 0$ – обменный интеграл, \mathbf{S}_i – плоский классический спин, связанный с i -м узлом двумерной решетки, p_i – числа заполнения: $p_i = 1$, если в i -м узле

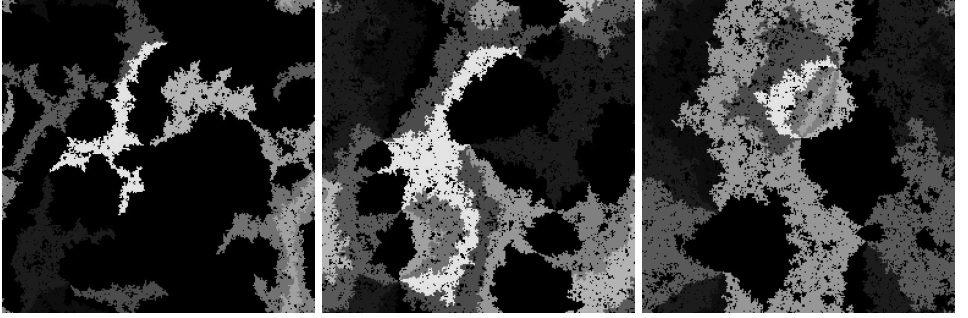


Рис. 1: Визуализация неравновесного процесса кластерного огрубления при релаксации из начального высокотемпературного состояния. Рост областей квазидального порядка (на рис. показаны оттенками) в моменты времени 2000, 70000 и 200000 MCS/s.

решетки находится спин, и $p_i = 0$, если в узле находится дефект. Дефекты распределялись по двумерной решетке с линейным размером L равномерно и некоррелированно с концентрацией $c_{\text{imp}} = 1 - p$, где p – спиновая концентрация.

Во второй главе осуществлено численное исследование неравновесных процессов кластеризации (см. рис. 1) и вихревой динамики в однородной и структурно неупорядоченной системе при старте из различных начальных состояний (см. рис. 2).

Для исследования кластеризации в двумерной XY-модели был разработан специальный алгоритм определения геометрических параметров областей квазидального порядка. Непрерывная фаза ϕ_i i -го спина $\mathbf{S}_i = (\cos \phi_i, \sin \phi_i)$ дискретизировалась на конечный набор значений $\{\phi_i\}_k$, с использованием которых производился классический поиск кластеров на решетке.

Вихревая динамика исследовалась с использованием разработанного алгоритма поиска и идентификации вихревых возбуждений в однородной и структурно неупорядоченной системе. Для поиска и идентификации вихрей и антивихрей в системе с дефектами перед процессом моделирования определялись все минимальные взаимно непересекающиеся контуры вокруг отдельных дефектов и их кластеров. Вдоль этих контуров в процессе моделирования определялся набор фазы спинов, по которой и выдавался вывод о присутствии вихря.

В результате моделирования получены динамические зависимости размеров крупных кластеров, средних размеров кластеров и количества кластеров, концентрации свободных и пиннированных вихрей в системе. Моделирование осуществлено для всей низкотемпературной фазы $T \leq T_{\text{ВКТ}}$ для широкого диапазона изменения концентрации примеси для различных начальных неравновесных состояний.

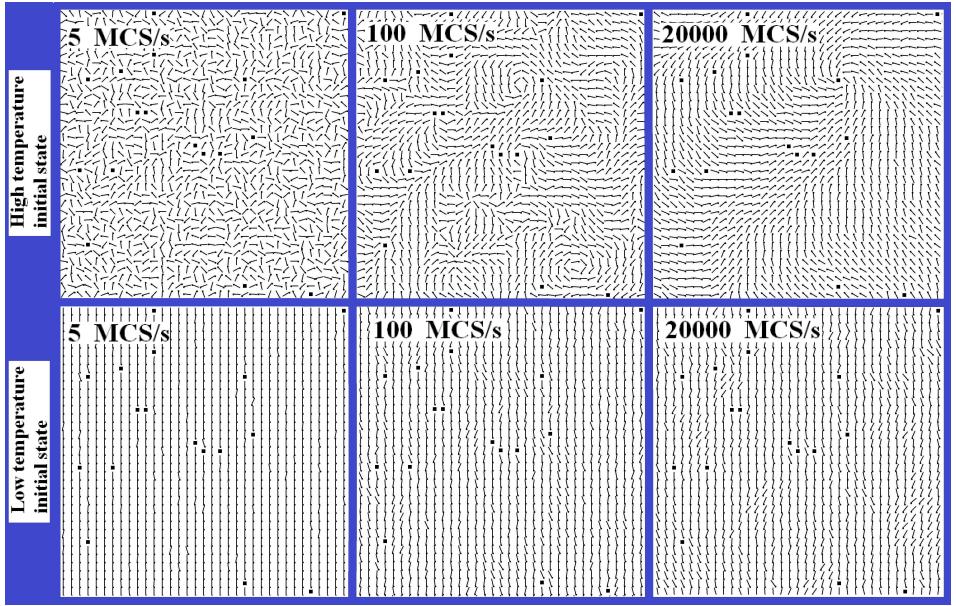


Рис. 2: Визуализации неравновесной критической релаксации структурно неупорядоченной двумерной XY-модели из начального высокотемпературного (сверху) и низкотемпературного (снизу) состояния. Стрелки – классические планарные спины. Квадраты – дефекты структуры. Времена наблюдения: 5, 100 и 20000 MCS/s, слева направо.

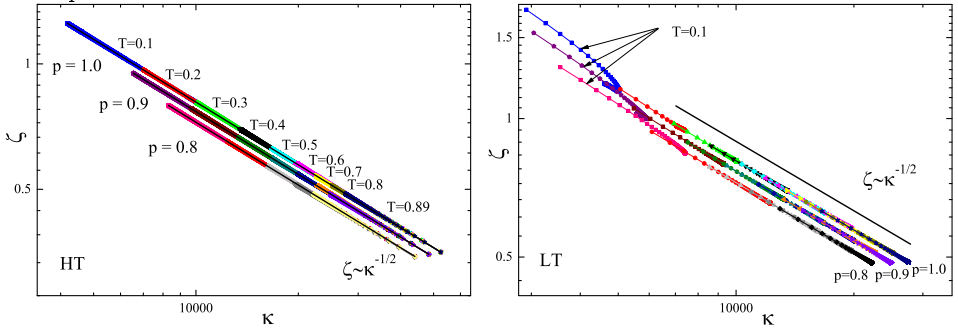


Рис. 3: Параметрическая зависимость среднего размера кластеров ζ от их количества κ и аппроксимация $\zeta \sim \kappa^{-1/2}$ для релаксации системы из начального высокотемпературного (слева) и низкотемпературного (справа) состояния для различных температур T и спиновых концентраций p .

Релаксация системы из начального высокотемпературного состояния сопровождалась процессом критического кластерного огрубления. При релаксации системы из начального низкотемпературного состояния происходит процесс кластерной фрагментации – один большой кластер фрагментируется на

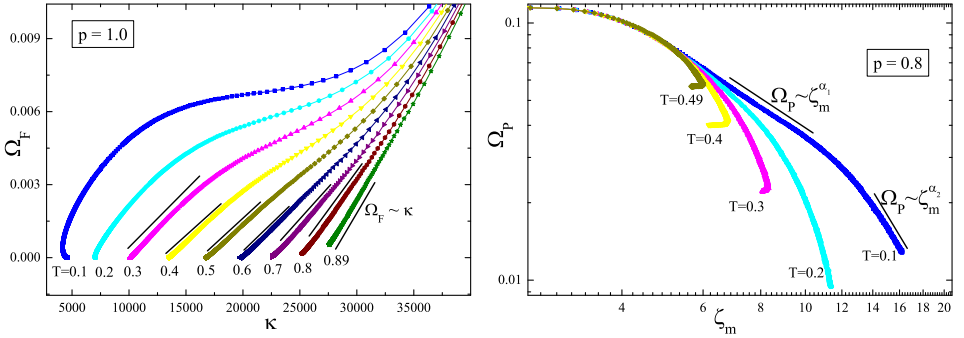


Рис. 4: Параметрическая зависимость концентрации свободных вихревых возбуждений Ω_F от количества кластеров в системе κ для однородной системы и зависимость концентрации пиннигованных вихрей Ω_P от размера больших кластеров ζ_m для структурно неупорядоченной системы с $p = 0.8$.

более малые. Обнаружено, что введение в систему дефектов структуры приводит к аномальному замедлению кластеризации. Выявлены инерционные эффекты в процессе кластеризации системы – в процессе огрубления размер крупных кластеров сначала поднимается выше равновесного, а затем к нему снижается, а в процессе фрагментации наоборот – размер крупных кластеров снижается ниже равновесного значения, а затем медленно возрастает. Следует отметить, что инерционные эффекты в огрублении проявляются на больших временах, в то время как в процессе фрагментации – на малых. Инерционные эффекты отмечаются в динамических зависимостях для размеров крупных кластеров и общего количества кластеров, однако не проявляются в зависимостях для среднего размера кластеров. Динамические зависимости отличаются высокой функциональной сложностью. В огрублении наблюдаются логарифмические и степенные зависимости на различных временных интервалах. Во фрагментации, особенно при низких температурах, наблюдаются резкие изломы и смены динамических режимов.

В результате моделирования было показано, что параметрическая зависимость среднего размера кластеров от их количества имеет вид $\zeta \sim \kappa^{-1/2}$ (см. рис. 3). Это позволило сделать вывод, что кластеризация в неравновесной критической релаксации двумерной ХУ-модели представляет собой всюду плотное заполнение плоскости кластеризованной кривой без самопересечений. Таким образом кластеризация на плоскости сводится к кластеризации кривой и к ее всюду плотной упаковке на плоскость.

Временные зависимости концентрации вихревых элементарных возбуждений в системе при релаксации из начального высокотемпературного состояния отличаются многорежимностью. В области низких температур обнаружены начальный, промежуточный и конечный степенной режимы, выход на рав-

новесие и кроссоверные области между ними. С повышением температуры промежуточный и конечный степенные режимы сливаются в один степенной режим. Наблюдаются пересечения динамических кривых концентраций для различных температур. Связано это с высокой начальной концентрацией вихревых возбуждений и нелинейностью межвихревого взаимодействия. Введение в систему структурного беспорядка существенно замедляет релаксацию вихревой подсистемы, что связано с неравновесным пиннингом вихрей на дефектах.

Исследование графических визуализаций и параметрических зависимостей характеристик кластеризации и вихревой динамики (см. рис. 4) показало, что образование областей квазидальнего порядка в системе взаимосвязано с вихревой подсистемой через «окаймляющее» действие вихрей. Вихревые возбуждения, будучи неоднородными областями, препятствуют образованию и росту кластеров. В структурно неупорядоченной системе динамика вихревой составляющей существенно замедлена вследствие неравновесного пиннинга на дефектах. Это приводит к аномальному замедлению кластеризации в системе. Таким образом, через «окаймляющее» действие и неравновесный пиннинг вихрей поле дефектов структуры существенно влияет на процессы кластеризации, вызывая аномальное замедление.

В третьей главе проведено численное исследование неравновесных эффектов старения в однородной и структурно неупорядоченной системе во всей низкотемпературной фазе из различных начальных состояний (см. рис. 2), а также рассчитаны температурные зависимости асимптотического значения величины флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ и величины эффективной температуры $T^{\text{eff}}(T, p)$. Э. П. Р. Э. Эффекты старения проявляются прежде всего в двухвременных зависимостях автокорреляционных функций и функций отклика системы. Выражения для автокорреляционной функции $C(t, t_w)$ и обобщенной динамической восприимчивости $\chi(t, t_w)$ для системы имеют следующий вид

$$C(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^2} \sum_i p_i \vec{S}_i(t) \vec{S}_i(t_w) \right\rangle \right]; \quad (2)$$

$$\chi(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^2 h^2} \sum_i p_i \vec{h}_i \vec{S}_i(t) \right\rangle \right], \quad (3)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle$ соответствуют процедуре статистического усреднения, а квадратные $[\dots]$ – процедуре усреднения по различным примесным конфигурациям для структурно неупорядоченной системы. Временная переменная t_w характеризует возраст образца и называется временем ожидания.

Флуктуационно-диссипативная теорема связывает равновесные функцию отклика $R(t, t_w) = R_{\text{eq}}(t - t_w)$ и автокорреляционную функцию $C(t, t_w) = C_{\text{eq}}(t - t_w)$ для времен $t > t_w \gg t_{\text{rel}}$ с использованием соотношения $TR_{\text{eq}}(t) = -dC_{\text{eq}}(t)/dt$.

Для систем с медленной динамикой вводится обобщение флуктуационно-диссипативной теоремы для описания неравновесных процессов через задание флуктуационно-диссипативного отношения:

$$X(t, t_w) = \frac{TR(t, t_w)}{\partial_{t_w} C(t, t_w)}. \quad (4)$$

В состоянии равновесия $X(t > t_w \gg t_{\text{rel}}) = 1$.

В неравновесном состоянии при проявлении эффектов старения $X(t, t_w) \neq 1$. Вводимое предельное значение флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w)$ становится новой универсальной характеристикой неравновесного поведения различных систем [5].

Определение X^∞ позволяет ввести понятие эффективной температуры $T_{\text{eff}} = T/X^\infty$, как характеристики, задающей направление тепловых потоков при установлении равновесия в системе. Временная зависимость T_{eff} может быть непосредственно измерена для систем со «стекольной» фазой в процессе их неравновесной эволюции. Важность определения T_{eff} для структурно неупорядоченных систем обусловлена тем, что T_{eff} характеризует флуктуации локальной критической температуры при неравновесных процессах, возникающие за счет сильного взаимодействия флуктуаций спиновой плотности через поле дефектов структуры.

Исследование эффектов старения осуществлялось из двух существенно различных начальных неравновесных состояний – высокотемпературного с $T_0 \gg T_{\text{ВКТ}}(p)$ и низкотемпературного с $T_0 = 0$. В системе при $T \gg T_{\text{ВКТ}}(p)$ в равновесии имеется высокая концентрация свободных вихревых возбуждений, что позволяет использовать такое состояние как начальное вихревое состояние для моделирования неравновесной критической релаксации в низкотемпературной фазе. При $T = 0$ система находится в основном состоянии, и все спины сонаправлены, вследствие чего при повышении температуры, оставаясь в низкотемпературной фазе, основную роль начинают играть спин-волновые возбуждения. Данный выбор начальных состояний позволил подробно исследовать влияние вихревых возбуждений и спин-волновых эффектов на неравновесную критическую релаксацию системы.

Для исследования нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы и определения величин флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ моделирование осуществлялось для большого набора времен ожидания t_w из широкого диапазона значений. Универсальные динамические величины опреде-

лялись как асимптотики $t_w \rightarrow \infty$ величин, значения которых выбирались на участках динамического скейлинга системы. Все это позволило контролировать и исследовать выход на асимптотику с целью определения универсальных характеристик системы.

Релаксация системы из начального высокотемпературного состояния сопровождается нарушением классического динамического скейлинга. Это было учтено при анализе временных зависимостей через использование логарифмической коррекции динамической зависимости корреляционной длины системы $\xi(t)$. Использовалось 16 времен ожидания t_w от 10 до 10^4 шагов Монте-Карло на спин (MCS/s). В двухвременных зависимостях автокорреляционной функции выявлено два динамических степенных режима релаксации: начальный $t - t_w < t_w$ и долговременной $t - t_w \gg t_w$, с динамическим кроссовером между ними. Рассчитаны показатели степенных зависимостей режимов для различных температур и спиновых концентраций. Анализ результатов показал, что рост концентрации дефектов приводит к усилению эффектов старения в системе, при этом долговременной режим релаксации сдвигается к большим значениям $t - t_w$. Асимптотические значения флуктуационно-диссипативного отношения $X(t_w)$ определялись только на скейлинговых участках. Итоговые температурные зависимости $X^\infty(T, p)$ (см. рис. 5 (а)) были аппроксимированы степенными функциями температуры с показателем $\lambda(p)$, уменьшающимся с увеличением доли структурного беспорядка в системе. Результат $X^\infty(T = T_{\text{ВКТ}}, p = 1.0)$ находится в удовлетворительном согласии с результатами спин-волнового расчета, однако расхождения объясняются учетом в моделировании вихревой составляющей в системе и полным учетом спин-волновых эффектов и спиновой диффузии. Исследование эффектов старения при релаксации системы из начального низкотемпературного состояния показало отсутствие выраженной асимптотики $t_w \rightarrow \infty$ величин на скейлинговых участках для разумных времен ожидания. С этим также может быть связан факт отсутствия в литературе конечных конкретных значений $X^\infty(T, p)$ для данного типа релаксации, несмотря на значительное количество публикаций по данной теме. Для всестороннего исследования критической релаксации системы из начального низкотемпературного состояния было осуществлено моделирование для больших величин времен ожидания $t_w \sim 50000 \text{ MCS/s}$. В результате были обнаружены новый динамический критический скейлинг $C(t, t_w) = t_w^{\eta/2} \Phi(\xi(t - t_w)/\xi(t_w)^\mu)$ и эффекты субстарения в системе. Был осуществлен расчет показателя скейлинга субстарения $\mu(T, p)$, величина которого в рамках статистической погрешности совпала со значениями аномальной размерности $\eta(T, p)$ системы для всех рассмотренных температур и спиновых концентраций. С использованием асимп-

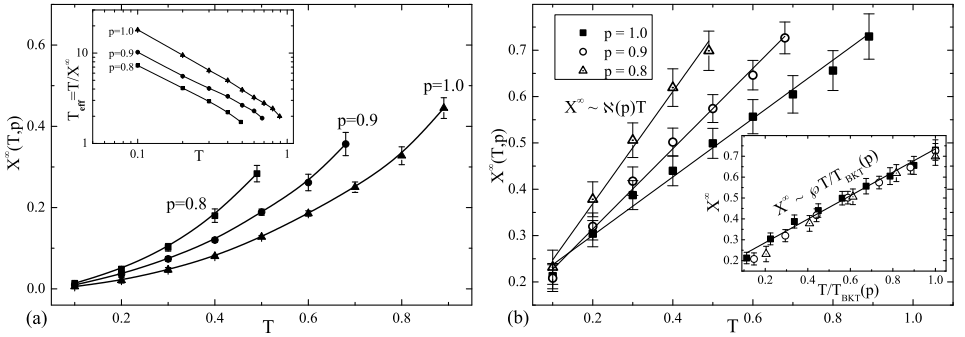


Рис. 5: Температурная зависимость асимптотического значения флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ для релаксации системы из начального высокотемпературного (a) и низкотемпературного (b) состояния для различных спиновых концентраций p . На вставке (a) – температурная зависимость эффективной температуры T_{eff} . На вставке (b) – линейная аппроксимация X^∞ как функция $T/T_{\text{BKT}}(p)$.

тотики $t_w \rightarrow \infty$ значений $X(t_w)$ на временных участках динамического скейлинга субстарения были получены температурные зависимости $X^\infty(T, p)$ для различных p (см. рис. 5 (b)). Данные зависимости были аппроксимированы линейным функциями вида $X^\infty \sim \aleph(p)T$, где $\aleph(p)$ возрастает с ростом концентрации примеси. Температурные зависимости для всех p были аппроксимированы линейной зависимостью $X^\infty \sim \wp T/T_{\text{BKT}}(p)$ с $\wp = 0.561 \pm 0.023$. Это позволило сделать вывод, что при релаксации системы из начального низкотемпературного состояния во всей низкотемпературной фазе преобладающим вкладом являются спин-волновые возбуждения.

В четвертой главе осуществлено численное исследование равновесных и динамических критических свойств однородной и структурно неупорядоченной двумерной XY-модели.

Определена температурная зависимость показателя Δ спада автокорреляционной функции $C(t - t') \sim (t - t')^\Delta$ для двух различных моделей динамики критических явлений: релаксационной динамики односпинового переворота Метрополиса с сохраняющимся параметром порядка и консервативной динамики двухспинового обмена Кавасаки с сохраняющимся параметром порядка. Сравнение полученных зависимостей между собой и с существующими аналитическими результатами показало, что динамика Метрополиса адекватно реализует динамическое критическое поведение двумерной XY-модели во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{BKT}}$, а динамика Кавасаки – только в области низких температур $T \ll T_{\text{BKT}}$.

С использованием метода отношений корреляционных функций на различных пространственных масштабах были рассчитаны температуры $T_{\text{BKT}}(p)$

для спиновых концентраций $p = 1.0, 0.9$ и 0.8 . Результат для однородной системы находится в хорошем согласии с результатами других работ.

Вычислена температурная зависимость поперечной жесткости $\rho(T, p)$ системы во всей низкотемпературной фазе. Для однородной системы ($p = 1.0$) в области низких температур $T \ll T_{\text{ВКТ}}$ наблюдается хорошее соответствие с результатами спин-волнового приближения. Однако с повышением температуры наблюдается рассогласование, связанное с вихревыми процессами и ангармоническими спин-волновыми вкладами. В структурно неупорядоченной системе ($p < 1.0$) значение $\rho(T = 0, p < 1.0) \neq 1.0$, что приводит к несостоятельности спин-волнового приближения даже в области $T \ll T_{\text{ВКТ}}(p)$. Связано это с пиннингом вихревых возбуждений на дефектах структуры, существенно видоизменяющем критические свойства системы. Из условия равенства нулю свободной энергии вихрей, выраженного через поперечную жесткость системы, были определены температуры перехода $T_{\text{ВКТ}}(p)$ для различных спиновых концентраций p . Они находятся в хорошем согласии с величинами, полученными через отношения корреляционных функций.

Осуществлен расчет температурной зависимости аномальной размерности системы (критического индекса Фишера) $\eta(T, p)$ для всей низкотемпературной фазы и $p = 1.0, 0.9$ и 0.8 . Результаты для однородной системы находятся в хорошем соответствии с результатами других работ, а для неупорядоченной – в соответствии с критерием Харриса.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертации.

Основные результаты и выводы

1. Разработаны численная методика исследования эффектов старения в неравновесном критическом поведении однородной и структурно неупорядоченной двумерной ХУ-модели во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}$ для широкого диапазона спиновой концентрации p при релаксации из различных начальных неравновесных состояний и методика определения температурных и концентрационных зависимостей асимптотического значения величины флуктуационно-диссипативного отношения X^∞ с использованием динамических скейлинговых зависимостей и широкого диапазона времен ожидания t_w .

2. Получены температурные зависимости асимптотического значения величины флуктуационно-диссипативного отношения $X^\infty(T, p)$ во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}(p)$ для различных спиновых концентраций p для различных неравновесных начальных состояний. Показано, что влияние дефектов структуры приводит к понижению величины критического значения $X^\infty(T = T_{\text{ВКТ}}(p), p)$ для вихревого начального состояния и не от-

ражается на данной величине – при спин-волновой релаксации из безвихревого состояния. Впервые получены степенные аппроксимационные зависимости $X^\infty(T, p) \sim T^{\lambda(p)}$ для релаксации из начального высокотемпературного состояния. Впервые полученная аппроксимация $X^\infty = f[T/T_{\text{ВКТ}}(p)] \sim \wp T/T_{\text{ВКТ}}(p)$ с $\wp = 0.561 \pm 0.023$ для всех p для релаксации из начального низкотемпературного состояния показала, что основной вклад в динамику релаксации в данном случае дают спиновые волны.

3. Впервые в неравновесной релаксации системы из начального низкотемпературного состояния были обнаружены эффекты субстарения. Получены температурные зависимости индекса субстарения $\mu(T, p)$. Из сравнения с полученными температурными зависимостями для аномальной размерности $\eta(T, p)$ было показано, что $\eta(T, p) = \mu(T, p)$.

4. Впервые показано, что релаксационная динамика с несохраняющимся параметром порядка хорошо воспроизводит динамические свойства двумерной ХУ-модели во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}$, в то время как консервативная динамика с сохраняющимся параметром порядка – только в области низких температур $T \ll T_{\text{ВКТ}}$.

5. Осуществлен расчет температурной зависимости поперечной жесткости системы $\rho(T, p)$ для структурно неупорядоченной системы. Показано, что $\rho(T = 0, p < 1.0) \neq 1.0$. Показана неприменимость спин-волнового приближения для системы с дефектами. С использованием $\rho(T, p)$ определены температуры фазового перехода Березинского-Костерлица-Таулесса $T_{\text{ВКТ}}(p)$, которые находятся в соответствии с величинами, полученными другими методами.

6. Разработаны методики исследования неравновесных процессов кластеризации областей квазидальнего порядка и исследования неравновесной вихревой динамики во всей низкотемпературной фазе $T \leq T_{\text{ВКТ}}$ для широкого диапазона спиновой концентрации p при релаксации из различных начальных неравновесных состояний.

7. Впервые обнаружен эффект аномального замедления процессов кластеризации в структурно неупорядоченной системе. Показано, что данный эффект связан с «окаймляющим» действием вихрей и процессом пиннинга вихревых возбуждений на дефектах. Исследованы процессы кластерного огрубления и кластерной фрагментации в системе. Обнаружены многорежимные динамические зависимости различных характерных величин кластеризации и вихревой динамики.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах

Публикации в изданиях из списка ВАК:

1. Popov I.S., Prudnikov P.V., Prudnikov V.V. Non-equilibrium critical vortex dynamics of disordered 2D XY-model. // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 681. P. 012015.
2. Прудников П.В., Прудников В.В., Попов И.С. Неравновесные эффекты старения в критическом поведении структурно неупорядоченных планарных магнетиков. // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101. Вып. 8. С. 596.
3. Попов И.С., Прудников П.В. Старение, огрубление и вихревая динамика в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели. // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. Вып. 7/2. С. 161.
4. Prudnikov P.V., Popov I.S. Coarsening in Critical Dynamics of 2D XY-model. // Solid State Phenomena. 2015. V. 233-234. P. 8.
5. Прудников В.В., Прудников П.В., Алексеев С.В., Попов И.С. Исследование эффектов старения и температурной зависимости поперечной жесткости системы в двумерной XY-модели. // Физика металлов и металловедение. 2014. Т. 115. Вып. 12. С. 1254.
6. Prudnikov P.V., Popov I.S. Non-equilibrium critical dynamics in pure and diluted 2D XY-model. // Journal of Physics: Conference Series. 2014. V. 510. P. 012014.
7. Попов И. С., Прудников П. В. Численное исследование планарных сверхпроводящих систем в рамках 2D XY-модели // Вестник Омского университета. 2013. Вып. 2. С. 84.
8. Алексеев С. В., Прудников В. В., Прудников П. В., Попов И. С. Исследование эффектов старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в двумерной XY-модели при моделировании из начального состояния с малым значением намагниченности // Вестник Омского университета. 2011. Вып. 4. С. 55.

Монография:

9. Прудников В. В., Прудников П. В., Вакилов А. Н., Попов И. С. Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем и эффектов старения / Изд-во ОмГУ, 2015. – 334 с.

Статья в сборнике:

10. Попов И.С., Прудников П.В., Прудников В.В. Численное описание неравновесного критического поведения двумерной структурно неупорядоченной XY-модели методами Монте-Карло. // Сборник трудов «Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования». Часть 3. Под ред. Р.Р. Назирова, Л.Н. Шура., С. 150. – М.: ИКИ РАН, 2015.

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ:

11. Прудников П.В., Прудников В.В., Алексеев С.В., Попов И. С. Программа численного моделирования на многопроцессорной вычислительной системе неравновесного поведения однородной и структурно неупорядоченной двумерной XY модели в низкотемпературной фазе Березинского / Свидетельство № 2012661123, дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 07.12.2012.
12. Прудников П.В., Прудников В.В., Вакилов А.Н., Поспелов А.Н., Медведева М.А., Попов И. С. Комплекс моделирования неравновесных фазовых превращений

в сильно неупорядоченных спиновых системах / Свидетельство № 2014613547, дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 28.03.2014.

13. Попов И. С., Прудников П. В. Комплекс моделирования неравновесного поведения кластера атомов Fe на поверхности W[110] / Свидетельство № 2014618255, дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 13.08.2014.

14. Прудников В. В., Прудников П. В., Попов И. С. Идентификация топологических возбуждений в однородных и структурно неупорядоченных планарных магнетиках / Свидетельство № 2014618696, дата регистрации в Реестре программ для ЭВМ 28.08.2014.

Публикации в других изданиях:

15. Popov I.S., Prudnikov P.V., Prudnikov V.V. Non-equilibrium critical vortex dynamics of disordered 2D XY-model / Book of Abstracts "International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond". 2015. P. 33.

16. Popov I.S., Prudnikov P.V. Non-equilibrium coarsening domain grows and vortex dynamics in two-dimensional XY-model / Book of Abstracts The International Conference "Spin physics, spin chemistry and spin technology". 2015. P. 137.

17. Popov I.S., Prudnikov P.V. Effects of aging and coarsening in critical dynamics of 2D XY-model / Book of Abstracts Moscow International Symposium on Magnetism. Moscow. 2014. P. 530.

18. Попов И. С. Эффекты огрубления в неравновесном критическом поведении двумерной XY-модели / Сб. статей II Региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых по физике и математике. Омск. 2014. С. 95.

19. Popov I.S., Prudnikov P.V. Non-equilibrium critical dynamics of pure and diluted 2D XY model / Book of Abstracts. XXV IUPAP Conference on Computational Physics. 2013. P. 152.

20. Попов И. С., Прудников П. В. Исследование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченной двумерной XY-модели / Сб. статей региональной конференции магистрантов, аспирантов и молодых ученых ФМ ОмГУ. 2013. С. 62.

21. Попов И. С. Исследование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченной двумерной XY-модели / Сб. тезисов XXXVII региональной научно-практической конференции "Молодёжь третьего тысячелетия". 2013.

22. Попов И. С., Прудников П. В. Неравновесная критическая динамика однородной и структурно неупорядоченной двумерной XY-модели в фазе Березинского / Труды VIII Международной научно-технической конференции "Динамика систем, механизмов и машин секция "Математика, математическое моделирование". 2012. С. 84.

23. Попов И. С. Эффекты старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в однородной и структурно неупорядоченной двумерной XY-модели / сб. статей XXXVI региональной научно-практической конференции "Молодежь третьего тысячелетия" секции "Физико-математические науки 2012. С. 157.

24. Попов И. С. Эффекты старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в однородных и структурно неупорядоченных системах с аномально медленной критической динамикой / сб. статей конференции "Актуальные проблемы современной науки 2012. С. 111.

25. Попов И. С. Исследование эффектов старения в двумерной XY-модели / Сб. тезисов XXXV региональной научно-практической конференции "Молодёжь третьего тысячелетия". 2011. С. 377.

Список литературы

- [1] Березинский В.Л. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 907;
Березинский В.Л. Низкотемпературные свойства двумерных систем. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.
- [2] Коршунов С.Е. // УФН. 2006. Т. 3. С. 233.
- [3] Tu Y., Toner J. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 4326.
- [4] Vaz C. A. F., Bland J. A. C., Lauhoff G. // Rep. Progr. Phys. 2008. V. 71. P. 056501.
- [5] Calabrese P., Gambassi A. // J. Phys. A. 2005. V. 38. P. R133.